

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА МЕЖФАЗНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ БМК-5 С НАНОЧАСТИЦАМИ НИКЕЛЯ

Щипанова Т.А., Сафронов А.П., Бекетов И.В.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Полимерные композитные материалы представляют собой многокомпонентные системы, состоящие из матрицы, являющейся высокомолекулярным соединением, и дисперсных неорганических наполнителей, придающих материалу различные функциональные свойства. Одним из видов полимерных композитов являются магнитонаполненные композиты, представляющие особый интерес для различных областей современной электроники. Функциональные свойства полимерных композитов в значительной степени зависят от взаимного расположения частиц наполнителя в полимерной матрице. Влияние структурной организации частиц на межфазное взаимодействие в магнитонаполненных полимерных композитах практически не изучено.

Целью данной работы являлось получение композитов на основе полимера БМК-5 с добавлением магнитных частиц никеля, структурированных магнитными полями различной величины, с последующим изучением их термодинамических свойств.

В качестве полимерной матрицы был использован сополимер бутилметакрилата с 5% метакриловой кислоты БМК-5. В качестве наполнителя использовали нанопорошок никеля ($S=8 \text{ м}^2/\text{г}$), полученный в лаборатории импульсных процессов Института электрофизики УрО РАН методом электровзрыва проволоки. Форма частиц порошка близка к сферической, средний размер частиц $d=84 \text{ нм}$. Намагниченность насыщения порошка $50 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$.

Для получения композитов к раствору сополимера БМК-5 в этилацетате добавляли суспензии порошка никеля в этилацетате, предварительно подвергнутые ультразвуковой обработке. Полученную суспензию перемешивали на диссольвере. Композиты получали методом отливки на стеклянной поверхности с испарением растворителя при комнатной температуре в магнитных полях до 400 Э. Они представляли собой пленки толщиной 60 мкм.

Изучение энтальпии смешения композитов проводили с помощью калориметрического метода с использованием микрокалориметра Кальве.

Навески композитов высушивали до постоянной массы и запаивали в тонкостенные стеклянные ампулы объемом $0,3\text{-}0,5 \text{ см}^3$. При вы-

полнении опытов ампулы разбивали в калориметрической камере, заполненной хлороформом, и измеряли тепловой эффект растворения.

Используя термохимический цикл, были рассчитаны значения энтальпии смешения в системе БМК-5/Ni во всем диапазоне содержания наполнителя для различных магнитных полей.

В области степеней наполнения до 60% магнитное поле значительно влияет на взаимное расположение частиц никеля в композите, что отражается на величине энтальпии смешения. Данная величина принимает отрицательные значения как в отсутствии магнитного поля, так в полях порядка 400 Э. Однако в малых магнитных полях (порядка 100 Э) энтальпия смешения больше нуля. В области более высоких степеней наполнения энтальпия смешения отрицательна и не зависит от величины магнитного поля.

Работа выполнялась при финансовой поддержке проектов фундаментальных исследований УрО РАН и гранта УрО РАН – CRDF RUE2-7103-EK-13.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА АГРЕГАЦИИ ИНГИБИТОРА ХЛОРИДА ТЕТРААЛКИЛАММОНИЯ В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Жижина М.С., Ширококов И.Б.

Удмуртский государственный университет
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, д. 1

В современной жизни применение мицеллярных растворов достаточно широко. Для проведения исследований на молекулярном уровне, получения подробной информации о структуре и термодинамических характеристиках ассоциатов, процессе агрегации в растворах используются методы молекулярного моделирования.

В качестве объектов исследования были выбраны ингибиторы кислотной коррозии хлориды тетраметиламмония (ТМА) и тетраэтиламмония (ТЭА) и исследован процесс их агрегации в полярном (вода) и неполярном (циклогексан) растворителях.

Основные молекулярно-динамические расчеты выполнялись методом молекулярной динамики (МД) с использованием пакета GROMACS (version 4.5.4) и силового поля GMX, модель воды SPC. Визуализацию полученных данных осуществляли с использованием программы RasWin. Файлы исходной геометрии молекул хлоридов ТМА и ТЭА были созданы с использования сервера PRODRG с последующим добавлением аниона хлора. После этого был проведен молекулярно-